

О.О. СОБОЛЬ

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка  
(Просп. Академіка Глушкова, 2, Київ 03022; e-mail: sobololeks@gmail.com)**НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ  
ДІРАКІВСЬКИХ ЕЛЕКТРОНІВ У ПОЛІ  
ДВОХ ПРОТИЛЕЖНО ЗАРЯДЖЕНИХ ЯДЕР**

УДК 539.1.01

У роботі досліджено рівняння Дірака для електрона в потенціалі скінченного електричного диполя за допомогою техніки лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО). Кулонівський потенціал ядер, що утворюють диполь, регуляризований шляхом врахування їх скінченних розмірів. Показано, що при перевищенні деякого критичного значення дипольного моменту спостерігається новий тип надкритичної нестабільності: хвильова функція найвищого заповненого електронного рівня змінює свою локалізацію з від'ємно зарядженого ядра на додатно заряджене, що можна проінтерпретувати як спонтанне народження з вакууму пари електрона і позитрона, кожен із яких знаходиться у зв'язаному стані з відповідним ядром і частково його екранує.

*Ключові слова:* надкритична нестабільність, зміна локалізації хвильової функції, критичний дипольний момент, метод ЛКАО.

**1. Вступ**

Однією з перших перевірок, яку проходило кожне новостворене хвильове рівняння, завжди був спектр воднеподібного атома. Не стало винятком і рівняння Дірака, написане ним у 1928 році [1]. Того ж таки року Дарвін і Гордон [2, 3] отримали рівні енергії для одноелектронного атома, ядро якого несе заряд  $Ze$ :

$$E = mc^2 \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(\sqrt{(j+1/2)^2 - (Z\alpha)^2} + n_r)^2} \right]^{-1/2}, \quad (1)$$

де  $j$  – квантове число повного кутового моменту,  $n_r$  – радіальне квантове число. Для основного стану  $j = 1/2$ ,  $n_r = 0$ , тому  $E_0 = mc^2 \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$ . Очевидно, що для надвеликих зарядів ядер  $Z > \frac{1}{\alpha} \approx 137$  енергія основного стану стає уявною. Це явище назвали “падінням на центр”.

© О.О. СОБОЛЬ, 2016

ISSN 0372-400X. Укр. фіз. журн. 2016. Т. 61, № 9

І.Я. Померанчук та Я.А. Смородинський в 1945 році показали [4], що причиною падіння на центр є сингулярність точного потенціалу Кулона в початку координат. Розв'язок релятивістської задачі Кеплера з урахуванням скінченних розмірів атомного ядра показав, що при  $Z = 137$  ніяких особливостей немає, основний рівень енергії монотонно спадає, перетинає нуль, а при перевищенні так званого критичного значення заряду ядра  $Z_{cr} \approx 170$  занурюється в нижній континуум і в системі виникає нестабільність по відношенню до народження електрон-позитронних пар [5, 6]. Електрони заповнюють  $K$ -оболонку, частково екрануючи заряд ядра, а вільні позитрони летять на нескінченність. Однак ядер з таким зарядом не існує, тому ефект так і не був спостережений.

Згодом виникла ідея про лобові (або майже лобові) зіткнення ядер важких атомів, наприклад, урану [5, 7–9]. У цьому випадку їх сумарний заряд перевищує критичний і існує така відстань між ядрами, за якої відбувається занурення найнижчого зв'язаного стану в нижній континуум. Ця від-

стань також називається критичною. На жаль, у релятивістській задачі двох центрів змінні не розділяються в жодній системі координат, а тому побудувати аналітичний розв'язок не вдається [5, 6]. Проте, були проведені розрахунки за допомогою наближених методів квантової механіки, зокрема варіаційного [10], і було отримано залежності критичної відстані між ядрами від повного заряду системи.

Інтерес до проблеми надкритичної нестабільності значно зріс після експериментального відкриття графену в 2004 році [11]. Адже низькоенергетичні електронні збудження у цьому двовимірному кристалі мають ультрарелятивістський закон дисперсії (діраківський конус) і описуються  $(2+1)$ -вимірним безмасовим рівнянням Дірака [12–14]. Низкою експериментальних методик можна створити масову щільину в спектрі графену [13, 15, 16], тому маємо  $(2+1)$ -вимірний аналог квантової електродинаміки. Роль швидкості світла тут відіграє швидкість Фермі  $v_F \approx \frac{c}{300}$ , а тому константа зв'язку (аналог сталої тонкої структури) є значно більшою  $\tilde{\alpha} = \frac{e^2}{\hbar v_F} \approx \frac{300}{137} \approx 2,2$ . Хоча це значення ефективно зменшується за рахунок діелектричної проникності підкладки, на якій лежить графен, критичний заряд домішки, який спричиняє надкритичну нестабільність, є порівнянний з одиницею [17]. Нещодавно було експериментально спостережено явище надкритичної нестабільності в кластерах заряджених димерів  $Ca$  [18]. У роботах [19, 20] досліджено надкритичний колапс у найпростішому кластері з двох однакових домішок, обчислено залежність критичної відстані між ними від їх заряду та масової щільини. Було показано, що у випадку безщільного графену нестабільність виникає при перевищенні сумарним зарядом домішок критичного значення незалежно від відстані між ними.

У роботі [21] розглянуто задачу про дві різноміснні домішки у графені зі щільною. Обмежуючись випадком точкового диполя, автори досліджують особливості дискретного спектра електрона поблизу континуумів, виявляючи експоненційне згущення рівнів, схоже на ефімівський скейлінг. Але вони роблять висновок, що надкритичної нестабільності у цій системі не може бути. Ця задача знову розглядається в статтях [22, 23], де у випадку скінченного диполя автори показують, що надкритична нестабільність тут є, але має новий прояв:

у явищі міграції хвильової функції найвищого заповненого електронного стану, що інтерпретується як народження із вакууму пари електрона і дірки, кожен із яких зв'язаний з відповідною домішкою, екрануючи її заряд. Це дослідження дало мотивацію для розгляду аналогічної задачі в  $(3+1)$ -вимірній КЕД, який проводиться в цій роботі.

Нерелятивістська задача з рівнянням Шредінгера неодноразово розглядалася в літературі [24–27]. Виявляється, що у тривимірному просторі існує таке критичне значення дипольного моменту, нижче від якого в системі не може існувати зв'язаних станів:

$$D_{cr} = 0,6393 ea_0, \quad (2)$$

де  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \text{ \AA}$  – борівський радіус. У роботі [27] також показано, що в 1 та 2 просторових вимірах відповідні критичні значення дипольного моменту рівні нулю, тобто як завгодно малий дипольний момент породжує зв'язані стани.

Релятивістська задача з рівнянням Дірака для електрона в дипольному потенціалі раніше розглядалася в роботі [28]. Автори досліджували поведінку енергії в області поблизу континуумів та відповідні хвильові функції методом зшивання асимптотик. Квадроване рівняння Дірака на великих відстанях від диполя зводиться до вигляду рівняння Шредінгера і допускає асимптотичне роздільня змінних, що дозволяє встановити критичний дипольний момент, який наближено збігається із нерелятивістським значенням (2).

Задача з електричним диполем, очевидно, має зарядову симетрію, і ця симетрія відіграє провідну роль, призводячи до симетричного розміщення енергетичних рівнів відносно нуля. Ця симетрія призводить до того, що електронний і симетричний йому позитронний стани можуть перетнутися лише при  $E = 0$ . Але такий перетин є неможливим, оскільки ці стани мають однакові квантові числа, тому діє теорема про неперетинання рівнів Вігнера-фон Неймана [29]. Ця обставина зумовлює наявність характерних “перетяжок” у спектрі (див. рис. 5, 7).

Розгляд рівняння Дірака у полі електричного диполя також має відношення до опису поділу важкого мезона [6]. Дійсно, важкі кварк та антикварк мають протилежні кольорові заряди, а тому утворюють диполь. В кольоровому полі цього диполя (яке, в силу явища конфайнменту, наростає

при спробі розвести кварки на деяку відстань) може народитися пара легких кварка та антикварка, які зв'язуються із важкими і екранують їх заряд. Таким чином, з одного важкого мезона в результаті поділу утворюється два легших.

У цій роботі застосовано метод лінійних комбінацій атомних орбіталей для обчислення спектра і хвильових функцій електрона в потенціалі скінченного електричного диполя. Кулонівський потенціал ядер, що утворюють диполь, регуляризований шляхом врахування їх скінчених розмірів. В ролі атомних орбіталей використано хвильові функції кількох перших рівнів електрона у полі одного ядра, центровані на відповідному ядрі. Вжито заходів для розширення меж застосування методу ЛКАО на надкритичні заряди ядер. При цьому обчислення ведуться не лише біля краю континуумів, а по всій масовій щільності, що раніше не досліджувалося в літературі.

Стаття побудована таким чином. У розділі 2 наводиться точний розв'язок задачі з регуляризованим потенціалом одного ядра, проводиться аналіз різних типів регуляризацій. У розділі 3 за допомогою методу ЛКАО проводиться обчислення енергії та хвильових функцій електрона у дипольному потенціалі, досліджується їх поведінка при зміні дипольного моменту. Розділ 4 присвячений розширенню меж застосовності методу ЛКАО до ядер з великим зарядом. Узагальнення отриманих результатів та висновки наведені в розділі 5. Деякі технічні обчислення, які виникають у процесі застосування методу ЛКАО, наведені в Додатку.

## 2. Регуляризований потенціал одного ядра

Розглянемо задачу про рух електрона в потенціалі зарядженого ядра. Гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{H} = -i\hbar c \gamma^0 \boldsymbol{\gamma} \nabla + \gamma^0 m c^2 - Z e^2 v(r), \quad (3)$$

де  $v(r)$  – функція, яка описує регуляризований потенціал Кулона,  $\gamma^\mu$  ( $\mu = 0, 3$ ) – матриці Дірака, для яких у цій роботі використовується стандартне представлення Дірака–Паулі.

Для зручності проведення обчислень здійснимо безрозмірнення. Усі енергетичні величини в подальшому без зміни позначень вимірюватимуться в одиницях енергії спокою електрона  $E_0 = m c^2 \approx 0,511$  MeV, а всі відстані – в одиницях комптонівської довжини хвилі для електрона

$\lambda_C = \frac{\hbar}{m c} \approx 386$  фм. Також введемо позначення  $\zeta = Z\alpha$ , де  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  – стала тонкої структури.

Потенціал зарядженого ядра є сферично-симетричним, тому зберігається повний кутовий момент. Хвильові функції, які є власними для операторів  $\hat{J}^2$  та  $\hat{J}_z$ , слід шукати у вигляді:

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} g(r)\Omega_{j,j_z,l} \\ i f(r)\Omega'_{j,j_z,l'} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Тут  $l = j - 1/2$ ,  $l' = l + 1 = 2j - l$ , парність хвильової функції  $(-1)^l$ , кутова залежність описується сферичними спінорами  $\Omega$  та  $\Omega'$ , які мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Omega_{j,j_z,l} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+j_z}{2j}} Y_{l,j_z-1/2} \\ \sqrt{\frac{j-j_z}{2j}} Y_{l,j_z+1/2} \end{pmatrix}, \\ \Omega'_{j,j_z,l'} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-j_z+1}{2j+2}} Y_{l',j_z-1/2} \\ \sqrt{\frac{j+j_z+1}{2j+2}} Y_{l',j_z+1/2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5)$$

де сферичні гармоніки означені стандартним чином [30]:

$$\begin{aligned} Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \times \\ &\times P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \end{aligned} \quad (6)$$

Хвильові функції, які для того самого значення  $j$  мають протилежну парність до означених в (4) шукають в аналогічному вигляді, але в них сферичні спінори  $\Omega$  та  $\Omega'$  слід поміняти місцями (додатковий фазовий множник  $i$  введений для зручності):

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \begin{pmatrix} i\tilde{g}(r)\Omega'_{j,j_z,l'} \\ -\tilde{f}(r)\Omega_{j,j_z,l} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Після підстановки (4), (7) до рівняння Дірака  $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ , отримаємо такі системи звичайних диференціальних рівнянь на радіальні функції:

$$\begin{cases} g' - \frac{j-1/2}{r} g - f(1 + E + \zeta v(r)) = 0, \\ f' + \frac{j+3/2}{r} f - g(1 - E - \zeta v(r)) = 0, \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} \tilde{g}' + \frac{j+3/2}{r} \tilde{g} - \tilde{f}(1 + E + \zeta v(r)) = 0, \\ \tilde{f}' - \frac{j-1/2}{r} \tilde{f} - \tilde{g}(1 - E - \zeta v(r)) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Умова нормування хвильових функцій (з урахуванням ортонормованості сферичних співорів) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \int_0^{+\infty} r^2 (f^2(r) + g^2(r)) dr = 1, \\ \langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle &= \int_0^{+\infty} r^2 (\tilde{f}^2(r) + \tilde{g}^2(r)) dr = 1. \end{aligned} \quad (10)$$

Для кожного фіксованого значення квантового числа  $j$  системи рівнянь (8) та (9) мають нескінченно багато розв'язків, які задовольняють умови нормування (10), тому задаватимемо їх радіальним квантовим числом  $n_r = 0, 1, 2, \dots$ . Орбітальне квантове число  $L$  сферичного спінора, який фігурує у верхній компоненті хвильової функції позначатимемо у вигляді великих латинських букв за стандартною відповідністю:  $S (L = 0)$ ,  $P (L = 1)$ ,  $D (L = 2)$ ,  $F (L = 3) \dots$ . За аналогією з нерелятивістським випадком, введемо головне квантове число  $n = n_r + L + 1$ . Терм будемо позначати за Рассел-Саундерсом [31], додатково будемо вказувати значення проекції кутового моменту:  $|n L_j, j_z\rangle$ . Таким чином, перші три стани (за енергією) мають такі набори квантових чисел:

$$1) j = 1/2, j_z = \pm 1/2, n_r = 0, L = l = 0, l' = 1, n = 1 \rightarrow |1S_{1/2}, \pm 1/2\rangle; \quad (11a)$$

$$2) j = 1/2, j_z = \pm 1/2, n_r = 0, L = l' = 1, l = 0, n = 2 \rightarrow |2P_{1/2}, \pm 1/2\rangle; \quad (11б)$$

$$3) j = 1/2, j_z = \pm 1/2, n_r = 1, L = l = 0, l' = 1, n = 2 \rightarrow |2S_{1/2}, \pm 1/2\rangle. \quad (11в)$$

Задача з регуляризованим потенціалом Кулона не допускає аналітичного розв'язку, тому будемо інтегрувати системи (8), (9) чисельно. Для цього знайдемо граничні умови для радіальних функцій при  $r = 0$ . Виразимо  $f$  (чи  $\tilde{f}$ ) з першого рівняння і підставимо в друге. Нехай характерний масштаб регуляризації  $r_0$ . Тоді при  $r < r_0$ ,  $v(r) \approx v(0) \gg 1$ . Асимптотику знайдемо з наближеного рівняння

$$g'' + \frac{2}{r}g' + \left( \zeta^2 v^2(0) - \frac{j^2 - 1/4}{r^2} \right) g = 0, \quad (12)$$

регулярний при  $r = 0$  розв'язок якого має вигляд:

$$g(r) \sim \frac{1}{\sqrt{r}} J_j(\zeta v(0)r). \quad (13)$$

Аналогічно досліджуємо асимптотичну поведінку і для розв'язків системи (9). При  $j = 1/2$  граничні умови можна вибрати у такому вигляді:

$$\begin{aligned} g(0) &= 1, \quad f(0) = 0; \\ \tilde{g}(0) &= 0, \quad \tilde{f}(0) = 1. \end{aligned} \quad (14)$$

Спектр визначаємо з умови того, що хвильова функція має експоненційно загасати при  $r \rightarrow \infty$ .

Результат залежить від конкретного способу регуляризації потенціалу. Розглянемо три можливості:

I. Регуляризація шляхом “виходу в 4-й вимір”:

$$v_I(r, r_0) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + r_0^2}}. \quad (15)$$

II. Регуляризація шляхом врахування скінченних розмірів ядра (заряд ядра рівномірно розподілений по його поверхні):

$$v_{II}(r, r_0) = \begin{cases} \frac{1}{r}, & r \geq r_0; \\ \frac{1}{r_0}, & r < r_0. \end{cases} \quad (16)$$

III. Регуляризація шляхом врахування скінченних розмірів ядра (заряд ядра рівномірно розподілений по його об'єму):

$$v_{III}(r, r_0) = \begin{cases} \frac{1}{r}, & r \geq r_0; \\ \frac{1}{r_0} \frac{3 - (r/r_0)^2}{2}, & r < r_0. \end{cases} \quad (17)$$

Для моделювання реального значення регуляризуючого параметра  $r_0$  використаємо відоме в ядерній фізиці емпіричне співвідношення для радіуса ядра [32]:

$$r_0 \approx 1,25 \text{ фм} \cdot A^{1/3}, \quad (18)$$

де  $A = Z + N$  – масове число ядра. Щоб знайти залежність радіуса ядра від його заряду, вважатимемо, що ядро лежить на так званій доріжці бета-стабільності, для якої існує наближений вираз [32]:

$$Z = \frac{A}{1,98 + 0,015A^{2/3}}. \quad (19)$$

Розв'язуючи кубічне рівняння, отримуємо залежність  $A = A(Z)$ , а потім з рівняння (18) маємо  $r_0 = r_0(Z)$ . Цю залежність зображено на рис. 1.

На рис. 2 наведено залежності енергії основного стану електрона в полі ядра від його заряду для трьох видів регуляризації, а також для порівняння наведено аналогічну криву для випадку нерегуляризованого потенціалу,  $E_{NR} = \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$ . З наведених залежностей бачимо, що для нерегуляризованого потенціалу при  $Z \gtrsim 137$  настає явище “падіння на центр”, коли енергія основного стану стає уявною і система вже не має визначеного основного стану. Ця проблема знімається, коли потенціал регуляризований (довільним чином). Енергія основного стану монотонно спадає і при деякому пороговому значенні заряду стає від’ємною. Залежно від типу регуляризації порогове значення заряду лежить у межах  $Z_0 = 148-152$ . Після цього енергія продовжує монотонно спадати і при досягненні критичного значення рівень занурюється в нижній континуум, спричиняючи надкритичну нестабільність. Залежно від типу регуляризації, критичний заряд лежить у межах  $Z_{cr} = 170-186$ .

Найбільш природною є регуляризація третього типу (рівномірний розподіл заряду всередині ядра скінченного розміру), тому в подальшому в усіх чисельних розрахунках використовуватимемо саме її. Хоча для загальності в усіх формулах буде фігурувати довільно регуляризований потенціал  $v(r)$ .

На рис. 3 наведено залежності енергій перших трьох рівнів електрона (11) у регуляризованому кулонівському потенціалі (III тип регуляризації) від модуля заряду ядра. Для додатно зарядженого ядра рівні виходять із верхнього континууму, для від’ємно зарядженого – симетрично із нижнього континууму. На основі цих трьох рівнів енергії в наступних розділах буде побудований метод ЛКАО для знаходження енергії та хвильових функцій електрона у потенціалі диполя.

### 3. Метод ЛКАО для задачі з диполем

Тепер перейдемо до розгляду електрона в потенціалі скінченного електричного диполя. Обезрозмірений гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{H} = -i\gamma^0\gamma\nabla + \gamma^0 - \zeta(v(r_1) - v(r_2)), \quad (20)$$

де  $r_{1,2} = \sqrt{(z \pm R/2)^2 + \rho^2}$ ,  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  (див. рис. 4). На жаль, змінні в цій задачі не розділяються в жодній системі координат, тому будемо застосовувати наближені методи.

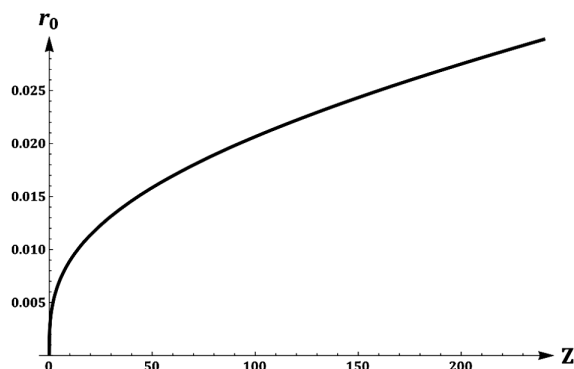


Рис. 1. Залежність регуляризуючого параметра  $r_0$  від заряду ядра  $Z$

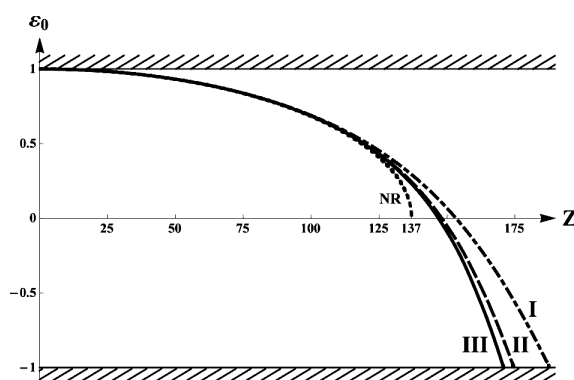


Рис. 2. Залежність енергії основного стану електрона в регуляризованому кулонівському потенціалі від заряду ядра для різних видів регуляризації: I – штрих-пунктирна крива, II – штрихова крива, III – суцільна крива. Для порівняння наведено аналогічну залежність для нерегуляризованого потенціалу – пунктирна крива (NR)

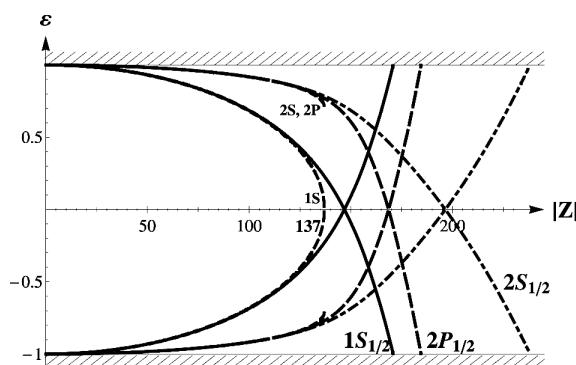


Рис. 3. Залежність енергій трьох перших рівнів електрона (11) у регуляризованому кулонівському потенціалі від заряду ядра:  $1S_{1/2}$  – суцільні криві,  $2P_{1/2}$  – штрихові криві та  $2S_{1/2}$  – штрих-пунктирні криві. Червоними штриховими кривими зображено енергії відповідних рівнів у нерегуляризованому потенціалі Кулона

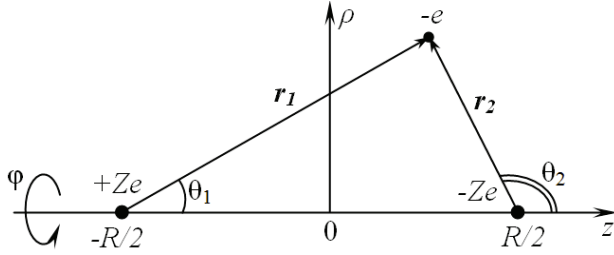


Рис. 4. Електрон в полі електричного диполя

Розміщення системи у просторі, система координат та деякі позначення наведені на рис. 4.

Проведемо аналіз методом лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО). Техніка ЛКАО є добре відомою і широко використовується в молекулярній фізиці [33]. Хвильові функції в цьому методі вибирають у вигляді лінійних комбінацій базисних функцій, які, як правило, є одноелектронними функціями, локалізованими на відповідних атомах у молекулі. Коефіцієнти лінійної комбінації визначають шляхом мінімізації повної енергії системи.

Означимо гамільтоніани для електрона в полі додатно і від'ємно зарядженого ядра відповідно:

$$\hat{H}_{\pm}(\zeta) = -i\gamma^0\gamma\nabla + \gamma^0 \pm \zeta v(r). \quad (21)$$

Оператор зарядового спряження ( $\hat{K}$  – оператор комплексного спряження)

$$\hat{U}_c = -i\gamma^2\hat{K}, \quad \hat{U}_c^2 = 1 \quad (22)$$

переводить ці гамільтоніани один в одного:

$$\hat{U}_c\hat{H}_+(\zeta)\hat{U}_c = -\hat{H}_-(\zeta). \quad (23)$$

Тому, якщо  $|\Psi\rangle$  є власною функцією гамільтоніана  $H_-(\zeta)$  з енергією  $E$ , то функція  $|\Psi_c\rangle = \hat{U}_c|\Psi\rangle$  є власною для гамільтоніана  $\hat{H}_+(\zeta)$  з енергією  $-E$ .

Використовуючи явний вигляд сферичних спінорів, неважко впевнитися, що

$$\begin{aligned} \sigma_2\Omega_{j,j_z,l}^* &= -i(-1)^{(l+1)-j_z+1/2}\Omega_{j,-j_z,l}, \\ \sigma_2\Omega_{j,j_z,l'}^* &= -i(-1)^{l'-j_z+1/2}\Omega_{j,-j_z,l'}, \end{aligned} \quad (24)$$

тобто дія оператора зарядового спряження змінює знак проекції кутового моменту.

Задача з дипольним потенціалом уже не має сферичної симетрії, тому повний момент не зберігається. Але все ще є аксіальна симетрія відносно

осі  $Oz$ , що проходить через обидва заряджені центри, тому зберігається проекція повного моменту на цю вісь. Пробну функцію методу ЛКАО оберемо як лінійну комбінацію хвильових функцій з однаковим значенням проекції кутового моменту ( $j_z = +1/2$ ):

$$|\Psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle, \quad (25)$$

де базисні стани мають вигляд:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1S_{1/2}, +1/2, r_1, \zeta\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} g_0(r_1)\Omega_{1/2,1/2,0}(1) \\ if_0(r_1)\Omega'_{1/2,1/2,1}(1) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} |2\rangle &= \hat{U}_c|1S_{1/2}, -1/2, r_2, \zeta\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} if_0(r_2)\Omega'_{1/2,1/2,1}(2) \\ g_0(r_2)\Omega_{1/2,1/2,0}(2) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (27)$$

У наведених виразах радіальні функції  $f_0(r)$ ,  $g_0(r)$  знаходяться з чисельного інтегрування задачі з одним ядром (див. Розділ 2).

Сферичні спінори мають вигляд:

$$\begin{aligned} \Omega_{1/2,1/2,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \Omega'_{1/2,1/2,1} &= \frac{i}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} \cos\theta \\ -\sin\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (28)$$

Спроекуємо рівняння Дірака  $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  по черзі на кожен із базисних станів:

$$\begin{aligned} c_1H_{11} + c_2H_{12} &= E(c_1 + c_2S), \\ c_1H_{21} + c_2H_{22} &= E(c_1S + c_2). \end{aligned} \quad (29)$$

Тоді з умови нетривіальності коефіцієнтів лінійної комбінації (25) маємо секулярне рівняння:

$$\det \begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} - SE \\ H_{21} - S^*E & H_{22} - E \end{vmatrix} = 0, \quad (30)$$

де  $H_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle$  – матричні елементи гамільтоніана, а  $S = \langle 1|2\rangle$  – інтеграл перекриття, який дорівнює нулю, як показано у формулі (A2) Додатку.

Для обчислення матричних елементів подамо повний гамільтоніан у вигляді:  $\hat{H} = \hat{H}_-(1) + \zeta v(r_2) = \hat{H}_+(2) - \zeta v(r_1)$ , тоді

$$H_{11} = -H_{22} = \varepsilon_0 + \zeta C, \quad (31a)$$

$$H_{12} = H_{21} = -\zeta A, \quad (31b)$$

де  $\varepsilon_0 = \varepsilon^{(1S)}(\zeta)$  – енергія основного стану електрона в полі одного ядра (див. рис. 2, 3). У виразах для матричних елементів фігурують кулонівський  $C$  та обмінний  $A$  інтеграли. Вирази для них наведені у формулах (A19), (A22) у Додатку 5. Ці інтеграли обчислюються за наявності функцій  $f_0$  та  $g_0$ .

Остаточно, маємо спектр:

$$\varepsilon = \pm \sqrt{(H_{11})^2 + (H_{12})^2} = \pm \sqrt{(\varepsilon_0 + \zeta C)^2 + \zeta^2 A^2}, \quad (32)$$

який є симетричним відносно нуля, що відображає зарядову симетрію задачі. Для від’ємної гілки у спектрі маємо такі коефіцієнти лінійної комбінації (25):

$$c_1 = \frac{H_{12}}{\sqrt{H_{12}^2 + (H_{11} + \sqrt{H_{11}^2 + H_{12}^2})^2}}, \quad (33)$$

$$c_2 = -\frac{H_{11} + \sqrt{H_{11}^2 + H_{12}^2}}{\sqrt{H_{12}^2 + (H_{11} + \sqrt{H_{11}^2 + H_{12}^2})^2}}.$$

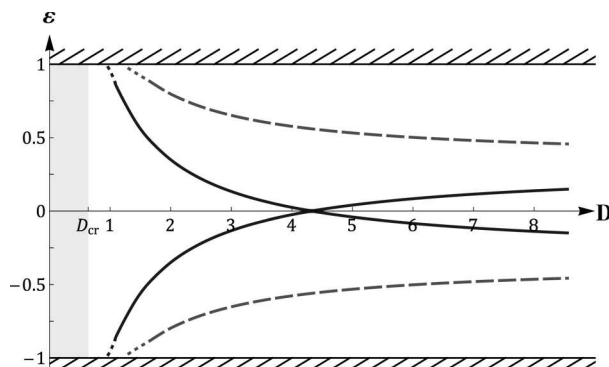
Неважко бачити, що при  $R \rightarrow \infty$   $C \approx \frac{1}{R} \rightarrow 0$ ,  $A \sim \exp(-\sqrt{1 - \varepsilon_0^2} R) \rightarrow 0$ . Тому при великих відстанях між ядрами, енергія системи  $\varepsilon \rightarrow \pm |\varepsilon_0|$ , що є цілком очікуваним фактом, оскільки тоді ми можемо вважати ядра ізольованими.

З виразу для енергії (32), а також із того, що  $C \geq 0$ , видно, що “перетяжка” в спектрі може виникнути лише при  $\varepsilon_0 < 0$ , а сам мінімум знаходиться поблизу точки, де  $\zeta C = |\varepsilon_0|$ . В цій же точці  $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$ , тобто відбувається явище зміни локалізації хвильової функції.

$$|c_2|^2 - |c_1|^2 = \frac{2H_{11}(H_{11} + \sqrt{H_{11}^2 + H_{12}^2})}{H_{12}^2 + (H_{11} + \sqrt{H_{11}^2 + H_{12}^2})^2} \sim \sim \text{sign}(H_{11}). \quad (34)$$

Величини  $C$  та  $|A|$  монотонно спадають зі збільшенням  $R$ . Спочатку  $|c_2| > |c_1|$ , тобто електронна густина локалізується переважно на від’ємно зарядженому ядрі, а після переходу через “перетяжку”  $|c_2| < |c_1|$ , тобто відбувається зміна локалізації хвильової функції на позитивно заряджене ядро.

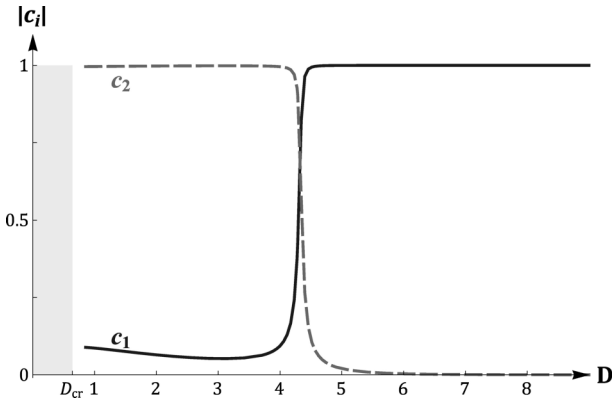
Також видно, що коли  $\varepsilon_0 > 0$ , то завжди  $H_{11} > 0$  і  $|c_2| > |c_1|$ , а тому хвильова функція увесь час залишається локалізованою переважно на негативному зарядженому ядрі, зміни локалізації немає.



**Рис. 5.** Залежність енергії основного стану електрона в полі електричного диполя від безрозміреного дипольного моменту  $D = \frac{D_{ph}}{ea_0} = \zeta R$  для двох значень заряду ядер:  $Z = 130$  – штрихові криві,  $Z = 156$  – суцільні криві. Фіолетовим виділено область, де не існує зв’язаних станів, див. формулу (2)

На рис. 5 зображено криві енергії основного стану електрона в полі електричного диполя для двох значень заряду ядер. При  $\zeta = 0,95$  ( $Z = 130$ ) енергія основного стану електрона в полі одного ядра є додатною ( $\varepsilon_0 = +0,35$ , див. рис. 3), тому в полі диполя енергія електрона монотонно змінюється зі зростанням дипольного моменту (червоні штриховані криві на рис. 5). При  $\zeta = 1,14$  ( $Z = 156$ ) енергія основного стану електрона в полі одного ядра є від’ємною ( $\varepsilon_0 = -0,30$ , див. рис. 3), тому в полі диполя енергія електрона проходить через “перетяжку” (сині суцільні криві на рис. 5), а хвильова функція найвищого заповненого стану при переході через цю перетяжку змінює свою локалізацію з від’ємно зарядженого ядра на додатно заряджене (рис. 6).

Всі рівні з від’ємною енергією виходять із нижнього континууму при перевищенні деякого критичного значення дипольного моменту (2). При цьому вони всі заповнені електронами з моря Дірака. Ці “морські” електрони спочатку локалізуються біля від’ємно зарядженого ядра. Потім при збільшенні відстані між ядрами (при зростанні дипольного моменту) відбувається міграція хвильової функції одного з таких морських електронів на додатно заряджене ядро. На його місці (поблизу від’ємно зарядженого ядра) залишається дірка – позитрон. Таким чином, маємо народжену з вакууму пару електрона і позитрона, які знаходяться у зв’язаному стані кожен зі своїм ядром, частко-



**Рис. 6.** Залежність коефіцієнтів лінійної комбінації (25) для найвищого заповненого електронного стану (нижня суцільна крива на рис. 5) від безрозмірного дипольного моменту  $D = \frac{D_{ph}}{ea_0} = \zeta R$  для заряду ядер  $Z = 156$ . Спостерігається явище зміни локалізації хвильової функції

во екрануючи його заряд. Слід зауважити, що для виникнення цього явища заряд ядер має бути великим настільки, щоб рівень електрона в полі додатного ядра перетнув нуль по енергії, або рівень електрона в полі додатного ядра і йому симетричний рівень в полі від'ємного ядра разом подолали відстань по енергії  $2mc^2$ .

Описане явище дуже схоже на надкритичний атомний колапс. Але відмінність полягає в тому, що там ми маємо одне ядро із зарядом  $Z \gtrsim 170$ , і в його полі найнижчий зв'язаний стан електрона сам досягає нижнього континууму (при цьому перетнувши відстань по енергії  $2mc^2$ ). Система стає нестабільною по відношенню до народження електрон-позитронних пар. Народжені електрони локалізуються на ядрі, частково екрануючи його заряд, а вільні позитрони летять на нескінченність.

Недоліком методу ЛКАО в даному розгляді є те, що асимптотична поведінка хвильових функцій на нескінченності  $\sim e^{-\sqrt{1-\varepsilon_0^2}r}$ , а не  $\sim e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}r}$ , як мало би бути. Особливо гостро цей недолік постає при малих відстанях  $R$  між ядрами, коли справжня енергія системи прямує до границь континуумів, а тому експоненційні загасання мають бути слабкими. Але в цьому методі хвильові функції будуються з хвильових функцій задачі з одним центром, а тому характер загасання у них за будь-яких відстаней є однаковим і визначається лише енергією основного стану електрона в полі одного

центра. Отже, при малих  $R$  даний метод є незастосовним.

Описаний метод базується лише на двох доданках у лінійній комбінації (25), тобто враховує наявність лише основного стану електрона в полі одного ядра. Цей опис досить добре працює для відносно малих зарядів. Але коли заряд ядер настільки великий, що основний рівень у полі додатного ядра і другий рівень у полі від'ємного ядра мають приблизно однакову енергію ( $Z \gtrsim 160$ , див. рис. 3), до лінійної комбінації слід включати також хвильові функції, що відповідають другому енергетичному рівню. Ситуація ще більше погіршується для надкритичних значень зарядів ядер, коли основний рівень занурюється в нижній континуум ( $Z \gtrsim 170$ , див. рис. 3). Тоді енергія основного стану стає комплексною, а хвильові функції – ненормованими і їх використання в ролі базисних функцій стає неможливим. Ці проблеми вирішуються деякою модифікацією методу ЛКАО, яка наведена в наступному розділі.

#### 4. Розширення меж застосовності методу ЛКАО

Для подолання описаних вище труднощів, шукатимемо хвильову функцію у вигляді наступної лінійної комбінації (такої кількості доданків досить для зарядів ядер  $Z \lesssim 185$ , для більших зарядів треба враховувати такі збуджені стани):

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^6 c_i |i\rangle, \quad (35)$$

де стани  $|i\rangle$  мають вигляд:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |1S_{1/2}, +1/2, r_1, \zeta_a\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} g_0(r_1)\Omega_{1/2,1/2,0}(1) \\ if_0(r_1)\Omega'_{1/2,1/2,1}(1) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (36a)$$

$$\begin{aligned} |2\rangle &= \hat{U}_c |1S_{1/2}, -1/2, r_2, \zeta_a\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} if_0(r_2)\Omega'_{1/2,1/2,1}(2) \\ g_0(r_2)\Omega_{1/2,1/2,0}(2) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (36б)$$

$$\begin{aligned} |3\rangle &= |2P_{1/2}, +1/2, r_1, \zeta_b\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} i\tilde{g}_0(r_1)\Omega'_{1/2,1/2,1}(1) \\ -\tilde{f}_0(r_1)\Omega_{1/2,1/2,0}(1) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (36в)$$



$$|4\rangle = \hat{U}_c |2P_{1/2}, -1/2, r_2, \zeta_b\rangle = \begin{pmatrix} \tilde{f}_0(r_2)\Omega_{1/2,1/2,0}(2) \\ -i\tilde{g}_0(r_2)\Omega'_{1/2,1/2,1}(2) \end{pmatrix}, \quad (36\text{г})$$

$$|5\rangle = |2S_{1/2}, +1/2, r_1, \zeta\rangle = \begin{pmatrix} g_1(r_1)\Omega_{1/2,1/2,0}(1) \\ if_1(r_1)\Omega'_{1/2,1/2,1}(1) \end{pmatrix}, \quad (36\text{д})$$

$$|6\rangle = \hat{U}_c |2S_{1/2}, -1/2, r_2, \zeta\rangle = \begin{pmatrix} if_1(r_2)\Omega'_{1/2,1/2,1}(2) \\ g_1(r_2)\Omega_{1/2,1/2,0}(2) \end{pmatrix}. \quad (36\text{е})$$

Тут  $r_{1,2} = \sqrt{(z \pm R/2)^2 + \rho^2}$ ,  $e^{i\theta_{1,2}} = \frac{z \pm R/2 + i\rho}{r_{1,2}}$ ,  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  (див. рис. 4). У наведених виразах радіальні функції  $f_i(r)$ ,  $g_i(r)$ ,  $\tilde{f}_i(r)$ ,  $\tilde{g}_i(r)$  знаходяться з чисельного інтегрування задачі з одним центром (див. розділ 2).

Окрім справжнього заряду ядра  $\zeta$ , тут введено два ефективних заряди  $\zeta_{a,b}$ . Вони потрібні для розширення меж застосовності нашого методу на надкритичні заряди ядер. Їх значення такі:

$$\zeta_a = \begin{cases} \zeta, & \zeta < \zeta_{c1}, \\ 0,99 \zeta_{c1}, & \zeta \geq \zeta_{c1}, \end{cases} \quad (37)$$

$$\zeta_b = \begin{cases} \zeta, & \zeta < \zeta_{c2}, \\ 0,99 \zeta_{c2}, & \zeta \geq \zeta_{c2}, \end{cases}$$

де  $\zeta_{c1}$ ,  $\zeta_{c2}$  – критичні значення зарядів, за яких у нижній континуум занурюються перший і другий енергетичні рівні, відповідно.

Спроєктуємо рівняння Дірака  $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$  по черзі на кожен із станів  $|i\rangle$ ,  $i = \overline{1,6}$ :

$$\sum_{j=1}^6 (H_{ij} - ES_{ij})c_j = 0. \quad (38)$$

Тоді з умови нетривіальності коефіцієнтів лінійної комбінації (35) отримаємо секулярне рівняння:

$$\det |H_{ij} - \varepsilon S_{ij}| = 0, \quad (39)$$

де  $H_{ij} = \langle i|\hat{H}|j\rangle$  – матричні елементи,  $S_{ij} = \langle i|j\rangle$  – інтеграли перекриття,  $i, j = \overline{1,6}$ .

Інтеграли перекриття обчислюються у Додатку. Серед недіагональних інтегралів є лише 4 незалежні:  $S_{14}$ ,  $S_{15}$ ,  $S_{16}$ ,  $S_{45}$ . Тому матриця Грама має вигляд:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ 0 & 1 & -S_{14} & 0 & -S_{16} & S_{15} \\ 0 & -S_{14} & 1 & 0 & 0 & -S_{45} \\ S_{14} & 0 & 0 & 1 & S_{45} & 0 \\ S_{15} & -S_{16} & 0 & S_{45} & 1 & 0 \\ S_{16} & S_{15} & -S_{45} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Для обчислення матричних елементів зручно подати повний гамільтоніан (20) у такому вигляді:

$$\hat{H}(\zeta) = \begin{cases} \hat{H}_-(\zeta_i, r_1) + \zeta v(r_2) - (\zeta - \zeta_i)v(r_1), \\ \hat{H}_+(\zeta_i, r_2) - \zeta v(r_1) + (\zeta - \zeta_i)v(r_2), \end{cases} \quad (41)$$

де  $\zeta_i = \{\zeta, \zeta_a, \zeta_b\}$ .

Зручність такого представлення полягає у тому, що стани  $|i\rangle$  є власними для  $\hat{H}_\pm$ :

$$\begin{aligned} \hat{H}_-(\zeta_a, r_1)|1\rangle &= \varepsilon^{(1S)}(\zeta_a)|1\rangle, \\ \hat{H}_+(\zeta_a, r_2)|2\rangle &= -\varepsilon^{(1S)}(\zeta_a)|2\rangle, \\ \hat{H}_-(\zeta_b, r_1)|3\rangle &= \varepsilon^{(2P)}(\zeta_b)|3\rangle, \\ \hat{H}_+(\zeta_b, r_2)|4\rangle &= -\varepsilon^{(2P)}(\zeta_b)|4\rangle, \\ \hat{H}_-(\zeta, r_1)|5\rangle &= \varepsilon^{(2S)}(\zeta)|5\rangle, \\ \hat{H}_+(\zeta, r_2)|6\rangle &= -\varepsilon^{(2S)}(\zeta)|6\rangle. \end{aligned} \quad (42)$$

При обчисленні матричних елементів виявляється, що незалежними є лише 12:

$$H_{11} = -H_{22} = \varepsilon^{(1S)}(\zeta_a) + \zeta C_1^{(2)} - (\zeta - \zeta_a)C_1^{(1)}, \quad (43\text{а})$$

$$H_{12} = -(2\zeta - \zeta_a)A_{12}^{(1)}, \quad (43\text{б})$$

$$H_{13} = -H_{24} = \zeta A_{13}^{(2)}, \quad (43\text{в})$$

$$H_{14} = H_{23} = -\varepsilon^{(2P)}(\zeta_b)S_{14} - \zeta A_{14}^{(1)} + (\zeta - \zeta_b)A_{14}^{(2)}, \quad (43\text{г})$$

$$H_{15} = -H_{26} = \varepsilon^{(2S)}(\zeta)S_{15} + \zeta A_{15}^{(2)}, \quad (43\text{д})$$

$$H_{16} = H_{25} = -\varepsilon^{(2S)}(\zeta)S_{16} - \zeta A_{16}^{(1)}, \quad (43\text{е})$$

$$H_{33} = -H_{44} = \varepsilon^{(2P)}(\zeta_b) + \zeta C_3^{(2)} - (\zeta - \zeta_b)C_3^{(1)}, \quad (43\text{є})$$

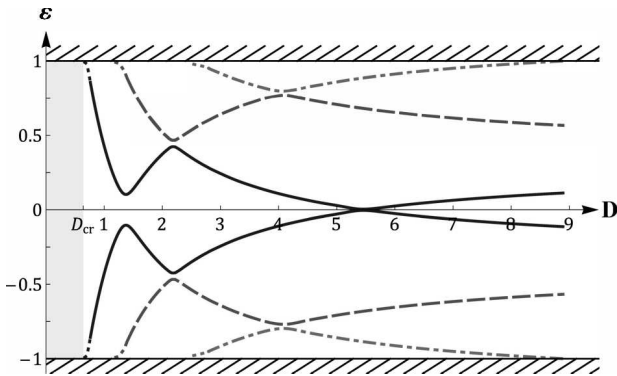
$$H_{34} = -(2\zeta - \zeta_b)A_{34}^{(1)}, \quad (43\text{ж})$$

$$H_{35} = -H_{46} = \zeta A_{35}^{(2)}, \quad (43\text{з})$$

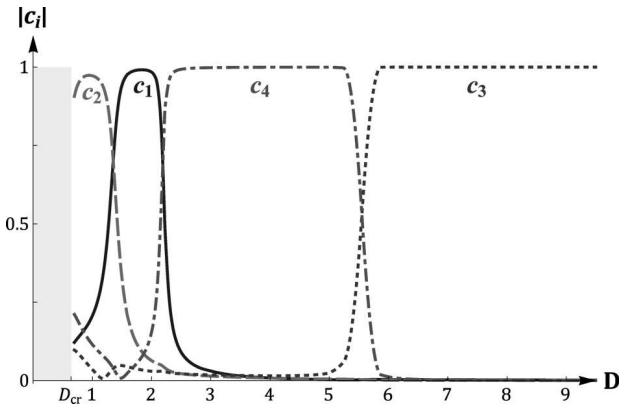
$$H_{36} = H_{45} = \varepsilon^{(2S)}(\zeta)S_{45} + \zeta A_{45}^{(2)}, \quad (43\text{и})$$

$$H_{55} = -H_{66} = \varepsilon^{(2S)}(\zeta) + \zeta C_5^{(2)}, \quad (43\text{і})$$

$$H_{56} = -\zeta A_{56}^{(1)}, \quad (43\text{і})$$



**Рис. 7.** Залежність енергії електрона в полі електричного диполя від безрозмірного дипольного моменту  $D = \frac{D_{ph}}{ea_0} = \zeta R$  для значення заряду ядер  $Z = 174$ . Різними типами ліній позначено різні енергетичні рівні. Фіолетовим виділено область, де не існує зв'язаних станів, див. формулу (2)



**Рис. 8.** Залежність коефіцієнтів лінійної комбінації (35) для найвищого заповненого електронного стану (нижня суцільна крива на рис. 7) від безрозмірного дипольного моменту  $D = \frac{D_{ph}}{ea_0} = \zeta R$  для заряду ядер  $Z = 174$ . Пояснення див. в тексті

де введено перепозначення для обмінних інтегралів  $A_{ij}^{(k)} = \langle i | v(r_k) | j \rangle$ ,  $i \neq j$ , та кулонівських інтегралів  $C_i^{(k)} = \langle i | v(r_k) | i \rangle$ . Всі незалежні обмінні та кулонівські інтеграли обчислюються в Додатку.

Спектр системи знаходимо з секулярного рівняння (39), а коефіцієнти лінійної комбінації  $c_i$  знаходимо як відповідні нормовані власні вектори:

$$(\mathbf{H} - \epsilon \mathbf{S})\vec{c} = 0, \quad (\vec{c})^\dagger \mathbf{S}\vec{c} = 1. \quad (44)$$

Коли ядра, які входять до складу диполя наближити дуже близько одне до одного, то вони частково екрануються і ефективно зменшують свої заря-

ди. По мірі їх віддалення це взаємне екранування зменшується. Тому віддалення ядер деякою мірою еквівалентне поступовому збільшенню заряду в нерухомих ядер від нуля до реального значення.

На рис. 7 зображено залежності енергії електрона в полі електричного диполя для значення заряду ядра  $Z = 174$  ( $\zeta = 1,27$ ). З рис. 3 бачимо, що для  $Z = 174$  перший рівень уже повністю перетнув масову щілину і занурився до нижнього континууму, а другий рівень (для додатного ядра) вже перетнувся із першим рівнем для від'ємного ядра і також перетнув нульове значення енергії, так що  $\epsilon^{(2P)} = -0,28 < 0$ . Ці три факти знаходять своє відображення у поведінці енергії та хвильових функцій електрона в потенціалі диполя.

Перша “перетяжка” на суцільних кривих на рис. 7 відповідає проходженню першого енергетичного рівня електрона в полі одного ядра через нуль (тобто випадок, розглянутий у попередньому розділі). Як і раніше, при переході через цю перетяжку відбувається міграція хвильової функції з від'ємного ядра на додатне, що відображено на рис. 8 (до перетяжки домінує коефіцієнт  $c_2$ , а після –  $c_1$ ). Ця міграція може бути проінтерпретована як народження з вакууму електрон-позитронної пари у зв'язаному з ядрами стані, так як це було зроблено в попередньому розділі.

Зближення і віддалення суцільної і штрихової кривих при  $D \approx 2,2$  відповідає перетину першого рівня в полі додатного ядра і другого рівня в полі від'ємного ядра (і навпаки). У цей момент на від'ємно зарядженому ядрі відбувається перехід електрона із заповненого другого рівня (штрихова крива) на незаповнений перший рівень (суцільна крива), починає домінувати коефіцієнт  $c_4$  на рис. 8. Одночасно з цим, поблизу додатного ядра електрон з першого рівня переходить на вільний другий рівень, тим самим звільняючи місце і створюючи передумови для народження наступної пари.

Нарешті, друга перетяжка на суцільних кривих на рис. 7 відповідає проходженню другого енергетичного рівня електрона в полі одного ядра через нуль. При переході через перетяжку відбувається перелокалізація хвильової функції з від'ємного ядра на додатне (до перетяжки домінує коефіцієнт  $c_4$ , а після –  $c_3$ , див. рис. 8). Це інтерпретується як народження з вакууму другої електрон-позитронної пари, аналогічно до першого випадку.

Отже, при поступовому адіабатичному збільшенні дипольного моменту відбувається народження з вакууму електрон-позитронних пар за рахунок явища міграції хвильової функції “морських” електронів. Їх максимальна кількість дорівнює кількості енергетичних рівнів електрона в полі одного ядра (для заданого значення його заряду), які перетнули нульове значення енергії.

## 5. Висновки

У роботі досліджується новий тип надкритичної нестабільності діраківських електронів у потенціалі скінченного електричного диполя, утвореного двома протилежно зарядженими ядрами.

Рівняння Дірака в даній задачі не допускає розділення змінних, тому використовуються наближені методи. Щоб обчислити спектр та хвильові функції електрона в полі диполя застосовується метод лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО). Він є досить простим у реалізації і дозволяє більшість розрахунків проводити аналітично, хоча, натомість, незастосовний при малих відстанях між домішками. В ролі атомних орбіталей використовуються хвильові функції основного та кількох перших збуджених станів електрона в потенціалі одного ядра, що центровані на відповідному ядрі.

Якщо заряди кожного з ядер є достатньо великими, щоб найнижчий зв'язаний стан електрона в полі одного з них перетинав рівень  $E = 0$  (тобто разом рівні електрона і позитрона перекривали інтервал  $2mc^2$ ), то при поступовому збільшенні відстані між центрами рівні електрона і позитрона спочатку виходять із відповідних континуумів і наближаються один до одного, прагнучи перетнутися, але (в силу теореми про неперетинання Вігнера-фон Неймана) не перетинаються, а починають розходитися і згодом асимптотично прямують до рівнів у полі одного центра. Таким чином, спектр має характерну “перетяжку”. При переході через неї хвильова функція електрона змінює свою локалізацію. Електрон на найвищому заповненому стані мігрує з від'ємно зарядженого центра на додатно заряджений. Ефективно це виглядає так, ніби електрон, що вийшов з діраківського вакууму, локалізується на додатному ядрі, екрануючи його, а біля від'ємного ядра локалізується позитрон. Тобто, як і у випадку надкритичної нестабільності

з однойменно зарядженими ядрами, народжується електрон-позитронна пара, але в даній задачі вона утворюється у зв'язаному стані. Також було показано, що за подальшого збільшення зарядів ядер можливе народження більшої кількості електрон-позитронних пар.

Якщо ж заряди ядер замалі, щоб рівні електрона і позитрона разом перекрили інтервал енергії  $2mc^2$ , таких явищ не спостерігається. Тому надкритична нестабільність у полі диполя має пороговий характер.

Порогові значення заряду ядер, які необхідні для виникнення явища міграції хвильової функції,  $Z \sim 150$ . На жаль, на сьогодні ядер з таким зарядом не існує у природі. До того ж, необхідно мати два ядра з протилежними знаками зарядів. Ці факти практично унеможливають експериментальне спостереження цього явища. Натомість, є надія на спостереження цього явища у графені, оскільки тут порогові значення зарядів є порівнянними з одиницею і немає проблем зі створенням домішок протилежних зарядів (додатні і від'ємні йони). Ці домішки можна рухати за допомогою голки електронного мікроскопа. Якщо спочатку зблизити їх, а потім рознести на велику відстань, то вони мають бути заекранованими. У цьому і проявиться описане явище.

*Висловлюю слова найщирішої вдячності Е.В. Горбару та В.П. Гусиніну за цінні поради і правки, внесені під час обговорення матеріалів даної роботи.*

## ДОДАТОК

### Інтеграли перекриття, кулонівські та обмінні інтеграли

У цьому Додатку наводяться обчислення інтегралів перекриття, кулонівських та обмінних інтегралів, які виникають при застосуванні техніки ЛКАО в задачі про електрон у дипольному потенціалі.

Інтеграли перекриття:

$$S_{ii} = 1, \quad S_{ji} = S_{ij}^* \quad i, j = \overline{1, 6}, \quad (A1)$$

$$\begin{aligned} S_{12} &\equiv S = \int d^3r \left[ ig_0(r_1)f_0(r_2)\Omega^\dagger(1)\Omega'(2) - \right. \\ &\quad \left. - ig_0(r_2)f_0(r_1)\Omega'^\dagger(1)\Omega(2) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho \, d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_1)f_0(r_2) \cos \theta_2 + g_0(r_2)f_0(r_1) \cos \theta_1 \right] = \\ &= |y \text{ 2 доданку } z \rightarrow -z| = 0, \end{aligned} \quad (A2)$$

$$S_{13} = \int d^3r \left[ ig_0(r_1)\tilde{g}_0(r_1)\Omega^\dagger(1)\Omega'(1) + if_0(r_1)\tilde{f}_0(r_1)\Omega^\dagger(1)\Omega(1) \right] = \frac{1}{4\pi} \int d^3r_1 \left[ g_0(r_1)\tilde{g}_0(r_1) - f_0(r_1)\tilde{f}_0(r_1) \right] \cos\theta_1 = 0, \quad (A3)$$

$$S_{14} = \int d^3r \left[ g_0(r_1)\tilde{f}_0(r_2)\Omega^\dagger(1)\Omega(2) - \tilde{g}_0(r_2)f_0(r_1)\Omega'^\dagger(1)\Omega'(2) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_1)\tilde{f}_0(r_2) - \tilde{g}_0(r_2)f_0(r_1) \cos(\theta_2 - \theta_1) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_1)\tilde{f}_0(r_2) - \frac{z^2 + \rho^2 - R^2/4}{r_1 r_2} \tilde{g}_0(r_2)f_0(r_1) \right], \quad (A4)$$

$$S_{15} = \int d^3r \left[ g_0(r_1)g_1(r_1)\Omega^\dagger(1)\Omega(1) + f_0(r_1)f_1(r_1)\Omega'^\dagger(1)\Omega'(1) \right] = \int_0^\infty dr r^2 \left[ g_0(r)g_1(r) + f_0(r)f_1(r) \right]. \quad (A5)$$

Слід зауважити, що  $S_{15} = 0$ , коли  $\zeta_a = \zeta$ , тому що в цьому випадку [1] і [5] є власними функціями одного і того ж гамільтоніана  $\hat{H}_-(\zeta)$ , що відповідають різним енергіям, а значить є ортогональними одна до одної:

$$S_{16} = \int d^3r \left[ ig_0(r_1)f_1(r_2)\Omega^\dagger(1)\Omega'(2) - ig_1(r_2)f_0(r_1)\Omega'^\dagger(1)\Omega(2) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_1)f_1(r_2) \cos\theta_2 + g_1(r_2)f_0(r_1) \cos\theta_1 \right] = |в 2 доданку z \rightarrow -z| = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left( g_0(r_1)f_1(r_2) - g_1(r_1)f_0(r_2) \right) \cos\theta_2, \quad (A6)$$

$$S_{23} = \int d^3r \left[ \tilde{g}_0(r_1)f_0(r_2)\Omega'^\dagger(2)\Omega'(1) - g_0(r_2)\tilde{f}_0(r_1)\Omega^\dagger(2)\Omega(1) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ \tilde{g}_0(r_1)f_0(r_2) \cos(\theta_2 - \theta_1) - g_0(r_2)\tilde{f}_0(r_1) \right] = |z \rightarrow -z| = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_1)\tilde{f}_0(r_2) - \frac{z^2 + \rho^2 - R^2/4}{r_1 r_2} \tilde{g}_0(r_2)f_0(r_1) \right] = -S_{14}, \quad (A7)$$

$$S_{24} = \int d^3r \left[ -ig_0(r_2)\tilde{g}_0(r_2)\Omega^\dagger(2)\Omega'(2) - if_0(r_2)\tilde{f}_0(r_2)\Omega'^\dagger(2)\Omega(2) \right] = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r_2 \left[ g_0(r_2)\tilde{g}_0(r_2) - f_0(r_2)\tilde{f}_0(r_2) \right] \cos\theta_2 = 0, \quad (A8)$$

$$S_{25} = \int d^3r \left[ ig_0(r_2)f_1(r_1)\Omega^\dagger(2)\Omega'(1) - ig_1(r_1)f_0(r_2)\Omega'^\dagger(2)\Omega(1) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_2)f_1(r_1) \cos\theta_1 + g_1(r_1)f_0(r_2) \cos\theta_2 \right] = |y 1 доданку z \rightarrow -z| = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_0(r_1)f_1(r_2) - g_1(r_1)f_0(r_2) \right] \cos\theta_2 = -S_{16}, \quad (A9)$$

$$S_{26} = \int d^3r \left[ g_0(r_2)g_1(r_2)\Omega^\dagger(2)\Omega(2) + f_0(r_2)f_1(r_2)\Omega'^\dagger(2)\Omega'(2) \right] = \int_0^\infty dr r^2 \left( g_0(r)g_1(r) + f_0(r)f_1(r) \right) = S_{15}. \quad (A10)$$

$$S_{34} = \int d^3r \left[ -i\tilde{g}_0(r_1)\tilde{f}_0(r_2)\Omega'^\dagger(1)\Omega(2) + \tilde{g}_0(r_2)\tilde{f}_0(r_1)\Omega^\dagger(1)\Omega'(2) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ \tilde{g}_0(r_1)\tilde{f}_0(r_2) \cos\theta_1 + \tilde{g}_0(r_2)\tilde{f}_0(r_1) \cos\theta_2 \right] = |y 2 доданку z \rightarrow -z| = 0, \quad (A11)$$

$$S_{35} = \int d^3r \left[ -ig_1(r_1)\tilde{g}_0(r_1)\Omega'^\dagger(1)\Omega(1) - if_1(r_1)\tilde{f}_0(r_1)\Omega^\dagger(1)\Omega'(1) \right] = \frac{1}{4\pi} \int d^3r_1 \left[ g_1(r_1)\tilde{g}_0(r_1) - f_1(r_1)\tilde{f}_0(r_1) \right] \cos\theta_1 = 0, \quad (A12)$$

$$S_{45} = \int d^3r \left[ g_1(r_1)\tilde{f}_0(r_2)\Omega^\dagger(2)\Omega(1) - \tilde{g}_0(r_2)f_1(r_1)\Omega'^\dagger(2)\Omega'(1) \right] = \frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_1(r_1)\tilde{f}_0(r_2) - \frac{z^2 + \rho^2 - R^2/4}{r_1 r_2} \tilde{g}_0(r_2)f_1(r_1) \right], \quad (A13)$$

$$S_{36} = \int d^3r \left[ -g_1(r_2)\tilde{f}_0(r_1)\Omega^\dagger(1)\Omega(2) + \tilde{g}_0(r_1)f_1(r_2)\Omega'^\dagger(1)\Omega'(2) \right] = -\frac{1}{2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \left[ g_1(r_2)\tilde{f}_0(r_1) - \frac{z^2 + \rho^2 - R^2/4}{r_1 r_2} \tilde{g}_0(r_1)f_1(r_2) \right] = |z \rightarrow -z| = -S_{45}, \quad (A14)$$

$$S_{46} = \int d^3 r \left[ ig_1(r_2) \tilde{g}_0(r_2) \Omega'^{\dagger}(2) \Omega(2) + \right. \\ \left. + if_1(r_2) \tilde{f}_0(r_2) \Omega^{\dagger}(2) \Omega'(2) \right] = \\ = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r_2 \left[ g_1(r_2) \tilde{g}_0(r_2) - f_1(r_2) \tilde{f}_0(r_2) \right] \cos \theta_2 = 0, \quad (\text{A15})$$

$$S_{56} = \int d^3 r \left[ ig_1(r_1) f_1(r_2) \Omega^{\dagger}(1) \Omega'(2) - \right. \\ \left. - ig_1(r_2) f_1(r_1) \Omega'^{\dagger}(1) \Omega(2) \right] = \\ = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho \, d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[ g_1(r_1) f_1(r_2) \cos \theta_2 + \right. \\ \left. + g_1(r_2) f_1(r_1) \cos \theta_1 \right] = |y \text{ 2 доданку } z \rightarrow -z| = 0, \quad (\text{A16})$$

Кулонівські інтеграли:

$$C_1^{(1)} = \int_0^{\infty} dr r^2 (f_0^2(r) + g_0^2(r)) v(r), \quad (\text{A17})$$

$$C_3^{(1)} = \int_0^{\infty} dr r^2 (\tilde{f}_0^2(r) + \tilde{g}_0^2(r)) v(r), \quad (\text{A18})$$

$$C_1^{(2)} \equiv C = \int d^3 r \frac{1}{4\pi} (f_0^2(r_1) + g_0^2(r_1)) v(r_2) = \\ = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} r^2 dr (f_0^2(r) + g_0^2(r)) \times \\ \times \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta v(\sqrt{r^2 - 2rR \cos \theta + R^2}) = \\ = \frac{1}{2R} \int_0^{\infty} dr r (f_0^2(r) + g_0^2(r)) \int_{|r-R|}^{r+R} dx xv(x) = \\ = \frac{1}{R} \int_0^R dr r^2 (f_0^2(r) + g_0^2(r)) + \\ + \int_R^{\infty} dr r (f_0^2(r) + g_0^2(r)) + \mathcal{O}(r_0^2), \quad (\text{A19})$$

$$C_3^{(2)} = \frac{1}{R} \int_0^R dr r^2 (\tilde{f}_0^2(r) + \tilde{g}_0^2(r)) + \\ + \int_R^{\infty} dr r (\tilde{f}_0^2(r) + \tilde{g}_0^2(r)) + \mathcal{O}(r_0^2), \quad (\text{A20})$$

$$C_5^{(2)} = \frac{1}{R} \int_0^R dr r^2 (f_1^2(r_1) + g_1^2(r_1)) + \\ + \int_R^{\infty} dr r (f_1^2(r_1) + g_1^2(r_1)) + \mathcal{O}(r_0^2). \quad (\text{A21})$$

Обмінні інтеграли:

$$A_{12}^{(1)} \equiv A = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz g_0(r_1) \times$$

$$\times f_0(r_2) \frac{z - R/2}{r_2} (v(r_1) - v(r_2)), \quad (\text{A22})$$

$$A_{13}^{(2)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dr r^2 (g_0(r) \tilde{g}_0(r) - f_0(r) \tilde{f}_0(r)) \times \\ \times \int_{-1}^1 dx xv(\sqrt{r^2 + R^2 - 2Rrx}), \quad (\text{A23})$$

$$A_{14}^{(k)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[ g_0(r_1) \tilde{f}_0(r_2) - \right. \\ \left. - \frac{z^2 + \rho^2 - R^2/4}{r_1 r_2} f_0(r_1) \tilde{g}_0(r_2) \right] v(r_k), \quad k = \overline{1, 2}, \quad (\text{A24})$$

$$A_{15}^{(2)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dr r^2 (g_0(r) g_1(r) + f_0(r) f_1(r)) \times \\ \times \int_{-1}^1 dx xv(\sqrt{r^2 + R^2 - 2Rrx}) = \\ = \frac{1}{R} \int_0^R dr r^2 (g_0(r) g_1(r) + f_0(r) f_1(r)) + \tilde{f}_0(r_2) + \\ + \int_R^{\infty} dr r (g_0(r) g_1(r) + f_0(r) f_1(r)) + \mathcal{O}(r_0^2), \quad (\text{A25})$$

$$A_{16}^{(1)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz (g_0(r_1) f_1(r_2) - \\ - f_0(r_2) g_1(r_1)) \cos \theta_2 v(r_1), \quad (\text{A26})$$

$$A_{34}^{(1)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \tilde{g}_0(r_1) \times \\ \times \tilde{f}_0(r_2) \frac{z + R/2}{r_1} (v(r_1) - v(r_2)), \quad (\text{A27})$$

$$A_{35}^{(2)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dr r^2 (g_1(r) \tilde{g}_0(r) - f_1(r) \tilde{f}_0(r)) \times \\ \times \int_{-1}^1 dx xv(\sqrt{r^2 + R^2 - 2Rrx}), \quad (\text{A28})$$

$$A_{45}^{(2)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz \left[ g_1(r_1) \tilde{f}_0(r_2) - \right. \\ \left. - \frac{z^2 + \rho^2 - R^2/4}{r_1 r_2} f_1(r_1) \tilde{g}_0(r_2) \right] v(r_2), \quad (\text{A29})$$

$$A_{56}^{(1)} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz g_1(r_1) f_1(r_2) \frac{z - R/2}{r_2} (v(r_1) - v(r_2)). \quad (\text{A30})$$

1. P.A.M. Dirac, The quantum theory of the electron. Part II, *Proc. R. Soc. London, Sect. A* **118**, 351 (1928) [DOI: 10.1098/rspa.1928.0056].

2. C.G. Darwin, The wave equations of the electron, *Proc. R. Soc. London, Sect. A* **118**, 654 (1928) [DOI: 10.1098/rspa.1928.0076].
3. W. Gordon, Die energieniveaus des wasserstoffatoms nach der diracschen quantentheorie des elektrons, *Z. Phys.* **48**, 11 (1928) [DOI: 10.1007/BF01351570].
4. I.Ya. Pomeranchuk and Y.A. Smorodinsky, On energy levels in systems with  $Z > 137$ , *J. Phys. USSR* **9**, 97 (1945).
5. Ya.B. Zeldovich and V.N. Popov, Electronic structure of superheavy atoms, *Sov. Phys. Usp.* **14**, 673 (1972) [DOI: 10.1070/PU1972v014n06ABEH004735].
6. W. Greiner, B. Müller, and J. Rafelski, *Quantum Electrodynamics of Strong Fields* (Springer-Verlag, Berlin, 1985).
7. S.S. Gershtein and Ya.B. Zeldovich, Positron production during the mutual approach of heavy nuclei and the polarization of the vacuum, *Sov. Phys. JETP* **30**, 358 (1970).
8. J. Rafelski, L.P. Fulcher, and W. Greiner, Superheavy elements and an upper limit to the electric field strength, *Phys. Rev. Lett.* **27**, 958 (1971).
9. B. Müller, H. Peitz, J. Rafelski, and W. Greiner, Solution of the Dirac equation for strong external fields, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1235 (1972) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.28.1235].
10. M.S. Marinov and V.S. Popov, Critical distance in collision of heavy ions, *Sov. Phys. JETP* **41**, 205 (1975).
11. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov *et al.*, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science* **306**, 666 (2004) [DOI: 10.1126/science.1102896].
12. V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and J.P. Carbotte, AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics, *Int. Journ. Mod. Phys. B* **21**, 4661 (2007) [DOI: 10.1142/S0217979207038022].
13. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009) [DOI: 10.1103/RevModPhys.81.109].
14. D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, and T. Chakraborty, Properties of graphene: A theoretical perspective, *Adv. Phys.* **59**, 261 (2010) [DOI: 10.1080/00018732.2010.487978].
15. G. Giovanetti, P.A. Khomyakov *et al.*, Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: *Ab initio* density functional calculations, *Phys. Rev. B* **76**, 073103 (2007) [DOI: 10.1103/PhysRevB.76.073103].
16. L.A. Ponomarenko *et al.*, *Nature* **497**, 594 (2013).
17. O.V. Gamayun, E.V. Gorbar, and V.P. Gusynin, Supercritical Coulomb center and excitonic instability in graphene, *Phys. Rev. B* **80**, 165429 (2009) [DOI: 10.1103/PhysRevB.80.165429].
18. Y. Wang *et al.*, Observing atomic collapse resonances in artificial nuclei on graphene, *Science* **340**, 734 (2013) [DOI: 10.1126/science.1234320].
19. O.O. Sobol, E.V. Gorbar, and V.P. Gusynin, Supercritical instability in graphene with two charged impurities, *Phys. Rev. B* **88**, 205116 (2013) [DOI: 10.1103/PhysRevB.88.205116].
20. O.O. Sobol, Variational method for the calculation of critical distance between two Coulomb centers in graphene, *Ukr. J. Phys.* **59**, 531 (2014).
21. A. de Martino, D. Klopfer, D. Matrasulov, and R. Egger, Electric-dipole-induced universality for Dirac fermions in graphene *Phys. Rev. Lett.* **112**, 186603 (2014) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.186603].
22. E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, and O.O. Sobol, Supercritical electric dipole and migration of electron wave function in graphene, *Europhys. Lett.* **111**, 37003 (2015) [DOI: 10.1209/0295-5075/111/37003].
23. E.V. Gorbar, V.P. Gusynin, and O.O. Sobol, Supercriticality of novel type induced by electric dipole in gapped graphene, *Phys. Rev. B* **92**, 235417 (2015) [DOI: 10.1103/PhysRevB.92.235417].
24. E. Fermi and E. Teller, The capture of negative mesotrons in matter, *Phys. Rev.* **72**, 399 (1947) [DOI: 10.1103/PhysRev.72.399].
25. J.E. Turner, Minimum dipole moment required to bind an electron-molecular theorists rediscover phenomenon mentioned in Fermi-Teller paper twenty years earlier, *Am. J. Phys.* **45**, 758 (1977) [DOI: 10.1119/1.10767].
26. D.I. Abramov and V.I. Komarov, Weakly bound states of a charged particle in a finite-dipole field, *Theor. Math. Phys.* **13**, 1090 (1972) [DOI: 10.1007/BF01035530].
27. K. Connolly and D.J. Griffiths, Critical dipoles in one, two, and three dimensions, *Am. J. Phys.* **75**, 524 (2007) [DOI: 10.1119/1.2710485].
28. V.I. Matveev, M.M. Musakhanov, and D.U. Matrasulov, Dirac electron in the electric dipole field, hep-th/9501027.
29. J. von Neumann and E.P. Wigner, Über die analytischen eigenschaften von gruppen linearer transformationen und ihrer darstellungen, *Z. Phys.* **30**, 467 (1929) [DOI: 10.1007/BF01187749].
30. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (Наука, Москва, 1989).
31. H.A. Bethe and E.E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Springer-Verlag, Berlin, 1957).
32. P. Marmier and E. Sheldon, *Physics of Nuclei and Particles, Vol. 1* (Academic Press, New York, 1969).
33. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Quantum Mechanics, Vol. 2* (Hermann, Paris, 1977).

Отримано 14.09.15

*O.O. Sobol*

SUPERCRITICAL INSTABILITY  
OF DIRAC ELECTRONS IN THE FIELD  
OF TWO OPPOSITELY CHARGED NUCLEI

S u m m a r y

The Dirac equation for an electron in a finite dipole potential has been studied within the method of linear combination of atomic orbitals (LCAO). The Coulomb potential of the nu-

clei that compose a dipole is regularized, by considering the finite nuclear size. It is shown that if the dipole momentum reaches a certain critical value, the novel type of supercriticality occurs; namely, the wave function of the highest occupied electron bound state changes its localization from the negatively charged nucleus to the positively charged one. This phenomenon can be interpreted as a spontaneous creation of an electron-positron pair in vacuum, with each of the created particles being in the bound state with the corresponding nucleus and partially screening it.